



PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11) Publication number: **09245018 A**

(43) Date of publication of application: 19 . 09 . 97

(51) Int. Cl. **G06F 17/00**
H01L 29/00
H01L 29/78
H01L 21/336
H01L 21/8247
H01L 29/788
H01L 29/792
// H01L 21/02
H01L 21/205
H01L 21/302
H01L 21/66

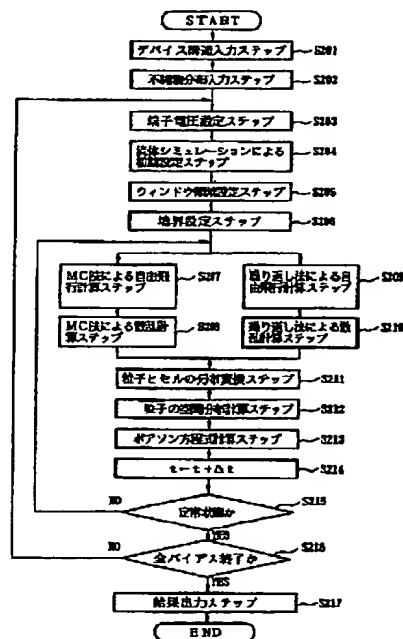
(21) Application number: **08056393**(22) Date of filing: **13 . 03 . 96**(71) Applicant: **TOSHIBA CORP**(72) Inventor: **MATSUZAWA KAZUYA**(54) **PARTICLE SIMULATION METHOD**

(57) Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a stable result while reducing the calculation time of particle simulation and the consumption of the respective kinds of computer resources.

SOLUTION: The boundary of a low probability area where the presence probability of particles is low and a high probability area where the presence probability of the particles is high is set (S206), the action of the particles is analyzed by an MC method for the low probability area (S207) and the action of the particles is analyzed by a repetition method for the high probability area (S209). Then, the particles are converted to cell distribution for the particles shifted to the outside of the low probability area by the action analysis of the low probability area, the cell distribution is converted to the particles for the particles shifted to the outside of the high probability area by the action analysis of the high probability area (S211) and the space distribution of the physical quantity of a device structure is obtained.

COPYRIGHT: (C)1997,JPO



(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公 開 特 許 公 報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平9-245018

(43) 公開日 平成9年(1997)9月19日

(51) Int.Cl. ⁶	識別記号	庁内整理番号	F I	技術表示箇所
G 0 6 F 17/00			G 0 6 F 15/20	D
H 0 1 L 29/00			H 0 1 L 29/00	
	29/78		21/02	Z
	21/336		21/205	
	21/8247		21/66	Z
審査請求 未請求 請求項の数 2 O L (全 10 頁) 最終頁に続く				

(21) 出願番号 特願平8-56393

(22) 出願日 平成8年(1996)3月13日

(71) 出願人 000003078

株式会社東芝

神奈川県川崎市幸区堀川町72番地

(72) 発明者 松澤 一也

神奈川県川崎市幸区小向東芝町1 株式会
社東芝研究開発センター内

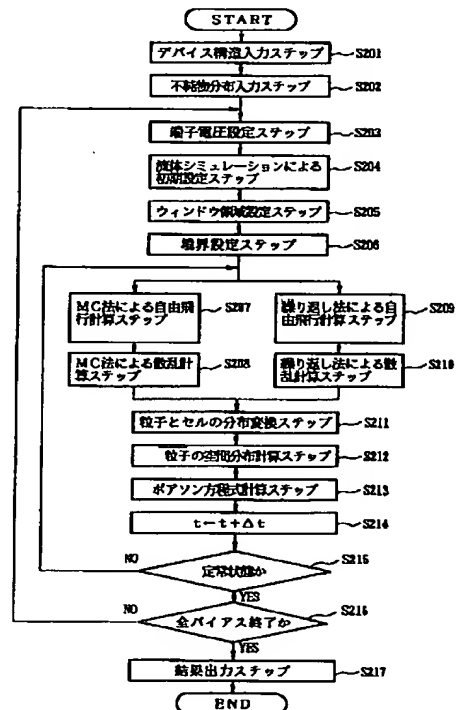
(74) 代理人 弁理士 三好 秀和 (外3名)

(54) 【発明の名称】 粒子シミュレーション方法

(57) 【要約】

【課題】 粒子シミュレーションの計算時間及び各種のコンピュータ資源の消費を低減しつつ、安定した結果を得ることである。

【解決手段】 粒子の存在確率が低い低確率領域と粒子の存在確率が高い高確率領域との境界を設定し (S206)、低確率領域についてMC法によって粒子の挙動を解析し (S207)、高確率領域について繰り返し法によって粒子の挙動を解析し (S209)、低確率領域の挙動解析によって低確率領域外に遷移した粒子について、粒子からセル分布に変換し、高確率領域の挙動解析によって高確率領域外に遷移した粒子について、セルの分布から粒子に変換し (S211)、デバイス構造の物理量の空間分布を得るようにしてある。



【特許請求の範囲】

【請求項1】 粒子の挙動を解析して物理量の空間分布を求めるシミュレーション方法において、
粒子の存在確率が低い低確率領域と粒子の存在確率が高い高確率領域との境界を設定し、

前記低確率領域についてモンテ・カルロ法によって粒子の挙動を解析し、

前記高確率領域について繰り返し法によって粒子の挙動を解析し、

前記低確率領域の挙動解析によって前記低確率領域外に遷移した粒子について、粒子からセル分布に変換し、
前記高確率領域の挙動解析によって前記高確率領域外に遷移した粒子について、セルの分布から粒子に変換し、
前記物理量の空間分布を得ることを特徴とする粒子シミュレーション方法。

【請求項2】 粒子の挙動を解析して物理量の空間分布を求めるシミュレーション方法において、

前記物理量の空間分布を求める際に、この空間分布を求める対象の所定の部分について、粒子の存在確率が低い低確率領域と粒子の存在確率が高い高確率領域との境界を設定し、

前記低確率領域についてモンテ・カルロ法によって粒子の挙動を解析し、

前記高確率領域について繰り返し法によって粒子の挙動を解析し、

前記低確率領域の挙動解析によって前記低確率領域外に遷移した粒子について、粒子からセル分布に変換し、
前記高確率領域の挙動解析によって前記高確率領域外に遷移した粒子について、セルの分布から粒子に変換し、
前記空間分布を求める対象の所定の部分以外の部分については、流体モデルを用いて空間分布を求め、
前記物理量の空間分布を得ることを特徴とする粒子シミュレーション方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は粒子シミュレーション方法に関し、特に、計算時間及び各種のコンピュータ資源の消費を低減しつつ、安定した結果を得ることができる粒子シミュレーション方法に関する。

【0002】

【従来の技術】粒子のいわゆる輸送問題のシミュレーションには、多くの場合、流体モデルが用いられる。これは、粒子の流れを流体とみなし、その濃度分布、速度分布、エネルギー分布といった、物理量の平均値の空間分布を求める手法である。この手法は、特定の物理量をもつ粒子が引き起こす現象を解析することは、多くの場合出来ない。例えば、半導体デバイスの劣化やEEPROMのホットエレクトロン書き込み特性などは、高エネルギーのキャリア（電子や正孔）が引き起こす現象である。流体モデルでは特定の場所のエネルギーの平均値を

求めることは出来る。

【0003】しかし、ある程度以上のエネルギーを持つ電子や正孔の個数を求めることは出来ない。また、半導体デバイスの製造工程のシミュレーションでも、流体モデルでは対応できない場合がある。例えば、エッチング工程においては、エッチングを起こすイオンを含むガスの濃度分布や温度分布は、流体シミュレーションで計算できるが、エッチングを起こす、特定のエネルギーと入射角度を持つイオンの挙動を解析することは、平均量を取り扱う流体シミュレーションでは対応出来ない。

【0004】そこで、上記のような特定条件の粒子の挙動を解析するには、モンテ・カルロ法（以下、場合によりMC法と記す）が用いられる（例えば、上村鉄夫 他著、「微粒子模型によるプラズマの計算機実験」、日本物理学会誌 第28巻 第12号 p1019, 1973年）。図6にMC法の問題図を示す。この手法は、通常数万個以上の粒子を用意する。そして、散乱と外場（電場や磁場）による粒子の状態変化を乱数によって追跡する。デバイス解析を例にとると、まずデバイス内部のキャリアの初期分布を何らかの方法で求め（多くの場合流体シミュレーションを用いる）、その分布に従いデバイス内部に粒子を配置する。そして、電場の中で粒子を運動させ、所定の時間毎にポアソン方程式によって電場の分布を更新する。

【0005】ここで、上述のMC法の手法の問題点は、有限個の粒子を追跡するため、分布が不安定になるおそれがある。特に上述したような、高エネルギーのキャリアやエッチングを起こすイオンの存在確率は低いため、安定な分布が得られない。図7にMC法により計算した電子のエネルギー分布の例を示す。低確率の高エネルギー領域には、十分な数の粒子が存在せず、非常に分布が不安定になる。図中の閾値は、例えばEEPROMのホットエレクトロン書き込みの場合、 3.1 eV である。

【0006】このようなMC法の不安定な分布を解決する方法として、繰り返し法がある（例えば、松澤一也著、「ボルツマン輸送方程式による半導体中のキャリア輸送の解析」、慶應義塾大学大学院電気工学修士論文、1986年。または、H.D.Rees, "Time response of the high-field electrons distribution in GaAs," IBM J. Res. Develop., vol.13, p.537, 1969.）。図8に繰り返し法の概念図を示す。この手法は、まず波数空間を所定の大きさに離散化する。離散化された個々をセルと称する。そして、各セルに粒子数の整数値ではなく、 $1.234\text{ E}-3$ や $5.678\text{ E}+3$ といった実数値を入れる。これにより、どのような低確率の領域でも、量子力学的な存在確率に従い、粒子分布の計算が可能である。以後、このセル中の実数値をセル分布と呼ぶ。これらのセル分布を散乱と外場による状態変化に応じて、セル間を繰り返し遷移させる。なお、問題に応じて、波数空間以外の、例えば速度空間やエネルギーの極座標空間を用

いる場合もある。この手法は、扱う波数の範囲が高いほど、多くのセルが必要になる(図9)。横軸はx方向の波数成分(k_x)、縦軸はy方向の波数成分(k_y)である。実際の計算では、z方向の波数成分(k_z)があるが、簡便のため図9では省略してある。

【0007】例えば、半導体デバイスの劣化やEEPROMのホットエレクトロン書き込み特性を評価するためには、数eV以上の分布が必要になる。エネルギーεと*

ここで、ħはプランク定数、m_xはx方向の有効質量、m_yはy方向の有効質

量、m_zはz方向の有効質量である。低確率の高いエネルギーを解析するためには、広い波数の範囲が必要になり、セルの数も膨大となる。その結果、コンピュータの資源(メモリーやCPUの計算時間等)の消費も膨大になる。

【0009】低確率の必要な領域のみにセルを設ければ、セルの数を節約できるので、コンピュータ資源も節約することができる。しかし、どの領域が必要であるか、予め知ることは一般には困難である。また、特定の低確率領域にセルを限定すると、プログラムの汎用性を著しく損ねることになる。

【0010】

【発明が解決しようとする課題】上述のように、流体モデルによる粒子シミュレーションでは、ある程度以上のエネルギーを持つ電子や正孔の個数を求めることは出来なかった。また、MC法による粒子シミュレーションでは、有限個の粒子を追跡するため、低確率領域における分布が不安定になる場合が多かった。さらに、繰り返し法による粒子シミュレーションでは、上述の問題点は解消するが、コンピュータ資源を大幅に必要とした。

【0011】本発明は、上記事情に鑑みてなされたものであり、その目的とするところは、計算時間及び各種のコンピュータ資源の消費を低減しつつ、安定した結果を得ることができる粒子シミュレーション方法を提供することにある。

【0012】

【課題を解決するための手段】上記目的を達成するため、第1の発明の特徴は、粒子の挙動を解析して物理量の空間分布を求めるシミュレーション方法において、粒子の存在確率が低い低確率領域と粒子の存在確率が高い高確率領域との境界を設定し、前記低確率領域についてモンテ・カルロ法によって粒子の挙動を解析し、前記高確率領域について繰り返し法によって粒子の挙動を解析し、前記低確率領域の挙動解析によって前記低確率領域外に遷移した粒子について、粒子からセル分布に変換し、前記高確率領域の挙動解析によって前記高確率領域外に遷移した粒子について、セルの分布から粒子に変換し、前記物理量の空間分布を得ることである。

【0013】また、第2の発明の特徴は、粒子の挙動を解析して物理量の空間分布を求めるシミュレーション方法において、前記物理量の空間分布を求める際に、この

* 波数の間には、例えば以下の関係がある。

【0008】

【数1】

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right)$$

【外1】

空間分布を求める対象の所定の部分について、粒子の存在確率が低い低確率領域と粒子の存在確率が高い高確率領域との境界を設定し、前記低確率領域についてモンテ・カルロ法によって粒子の挙動を解析し、前記高確率領域について繰り返し法によって粒子の挙動を解析し、前記低確率領域の挙動解析によって前記低確率領域外に遷移した粒子について、粒子からセル分布に変換し、前記高確率領域の挙動解析によって前記高確率領域外に遷移した粒子について、セルの分布から粒子に変換し、前記空間分布を求める対象の所定の部分以外の部分については、流体モデルを用いて空間分布を求め、前記物理量の空間分布を得ることである。

【0014】ここで、前記粒子には電子、正孔のほか、プラズマも含まれる。

【0015】また、上記物理量には、粒子の濃度分布、速度分布、エネルギー分布等が含まれる。

【0016】上記発明の構成によれば、高確率領域に多数のモンテ・カルロ法の粒子を配置する必要がないので、低確率領域に十分な数の粒子を配置できる。その結果、低確率領域でも非常に安定な分布が得られる。また、モンテ・カルロ法の粒子は、自然に重要な領域、例えば低確率領域等に集まるので、繰り返し法のようにあらゆる領域にセルを用意してメモリーを無駄にすることはない。これにより、計算時間及び各種のコンピュータ資源の消費を低減しつつ安定した結果を得ることができるのである。

【0017】

【発明の実施の形態】以下、本発明に係る粒子シミュレーションの実施形態について、図面を参照しながら説明する。

【0018】図1に本発明に係る粒子シミュレーションの概念図を示す。本図は、図面に向かって横軸はx方向の波数成分(k_x)、縦軸はy方向の波数成分(k_y)である。実際の計算ではz方向の波数成分(k_z)も存在するが、簡便のため省略してある。このうち、高エネルギー部分、すなわち、粒子の存在確率が低い低確率領域についてはMC法により計算するための粒子1を用意する。また、低エネルギー部分、すなわち、粒子の存在確率が多い高確率領域については繰り返し法により計算するためのセル3を用意する。図中の閾値5は、粒子の存在確率が低い低確率領域と粒子の存在確率が高い高確率領域

域との境界である。

【0019】本実施形態においては、ホット・エレクトロン書き込みの場合の閾値（3.1 eV）の場合について説明する。すなわち、本実施形態においては、3.1 eV未満の低エネルギー部分の波数空間に繰り返し法のセル3を配置し、3.1 eV以上の高エネルギー部分にMC法の粒子1を配置する。

【0020】以下、本発明に係る粒子シミュレーションの処理動作について図2を用いて説明する。

【0021】まず、デバイス構造入力ステップS201では、粒子シミュレーションを行う所定のデバイス構造の入力を行う。この入力には予め用意していたものを用いてもよく、また、操作者のよるマニュアル入力でもよい。本発明では、図4に示すようなMOSFETのデバイスシミュレーションを例に説明する。ここで、図4のMOSFETは、ゲート電極7と、ゲート酸化膜9と、ソース拡散層11と、ドレイン拡散層13と、基板15とを備えるものである。

【0022】続いて、不純物分布入力ステップS202は、デバイス構造入力ステップS201に入力されたデバイス構造の不純物分布を入力する。この入力には予め用意していたものを用いてもよく、また、操作者のよるマニュアル入力でもよい。

【0023】続いて、端子電圧設定ステップS203は、デバイス構造入力ステップS201に入力されたシミュレーションを行うデバイスの端子電圧の設定を行う。デバイスシミュレーションは複数の端子電圧について行うのが一般的であるので、複数の端子電圧を設定するようにしてもよい。

【0024】続いて、流体シミュレーションによる初期設定ステップS204は、流体モデルを用いたシミュレーションにより各種のパラメータの初期値を計算する。流体モデルとは、ポアソン方程式、電流連続式、エネルギー保存式を解くことによって、電位、キャリア、エネルギーの空間分布を求める手法である。流体モデルは、MC法や繰り返し法に比べて、100倍から1000倍高速である。この流体モデルを用いたシミュレーションにより初期値を求めるようにすることで、より高速に初期値を得ることができ、また、コンピュータ資源の消費を低減しつつ、安定した結果を得ることができる。また、後述するウインドウを用いた処理を行う場合には、そのウインドウ以外の部分の粒子シミュレーションとして用いる。

【0025】続いて、ウインドウ領域設定ステップS205は、粒子シミュレーションを行う領域（ウインドウ領域）の設定を行い、そのウインドウ領域を所定の空間メッシュに分割する。粒子シミュレーションを行う領域はデバイス構造の全てでも、その一部であってもよい。

【0026】デバイス構造の全てについて処理を行う場合には、図4に示すように、全ての基板15について空

間メッシュに分割し、また、図5に示すように設定したウインドウ領域17のみに空間メッシュの分割を行うようにしてもよい。これは、例えば、半導体デバイスのデバイスシミュレーションにおいて、高エネルギー分布を求める必要があるのは、ゲート電極下の基板表面の領域のみで足りるためである。

【0027】ウインドウ17領域外では、上述の流体モデルによるシミュレーション（S204）の結果を用いる。図5のような方法を実施することによって、図4の実施形態よりもさらに高速な計算が可能になる。

【0028】続いて、境界設定ステップS206は、以下のステップで説明するMC法による計算領域と繰り返し法による計算領域との境界を設定する。この設定は、例えば、操作者に入力要求を行うことで境界を設定してもよい。また、予め設定した条件において、設定したウインドウ領域の全てをMC法で行った場合のコンピュータの資源（CPUやメモリ等）の使用量を測定し、除々に繰り返し法のセルを大きくしていき、最小のコンピュータ資源の使用量の境界を境界値として設定するようにしてもよい。この手法を用いれば、よりコンピュータ資源の消費を低減しつつ、安定した結果を得ることができる。

【0029】ここで設定された境界によって、MC法を用いて計算する領域と、繰り返し法を用いて計算する領域とに分ける。

【0030】なお、図1の実施形態では、x, y, zの各軸上で3.1 eVとなるように、長方形（または直方体）の境界を設定する例を示した。実際には、エネルギーと波数の間には(1)式のような関係があり、 $\epsilon = 3.1$ eVの境界は楕円形（または楕円体）である。長方形（または直方体）の境界を用意すると、 $\epsilon = 3.1$ eV以上の領域にもセルが配置され、その分のメモリが無駄になる。従って、メモリを更に節約するために、楕円形（または楕円体）に近くなるようにセルを用意してもよい。

【0031】続いて、MC法による自由飛行計算ステップS207では、上記境界設定ステップS206にてMC法を用いて計算する領域に対して、自由飛行計算を行う。係る計算の概要は上述したので、ここでは省略する。

【0032】続いて、MC法による散乱計算ステップS208では、乱数によって散乱後の粒子の状態を計算する。

【0033】一方、繰り返し法による自由飛行計算ステップS209では、上記境界設定ステップS206にて繰り返し法を用いて計算する領域に対して、自由飛行計算を行う。係る計算の概要は上述したので、ここでは省略する。

【0034】続いて、繰り返し法による散乱計算ステップS210では、散乱確率分布に従い、セル分布を周囲

10

20

30

40

50

のセルに分配する。

【0035】続いて、粒子とセルの分布変換ステップS211は、粒子とセルの分布変換を行う。すなわち、セル内の分布が外場または散乱によって3.1eVを越えた場合、そのセル分布を粒子化する。一方、粒子のエネルギーが3.1eV以下になった場合、その粒子をセル分布に変換する。また、外場によって、セル分布または粒子が空間的に移動した場合は、移動した先の空間メッシュで上記の処理を行う。

【0036】続いて、キャリアの空間分布計算ステップS212では、粒子とセルの分布変換ステップS211で求められた粒子の濃度分布を用いて、デバイスの電荷分布を計算する。

【0037】続いて、ポアソン方程式計算ステップS213では、キャリアの空間分布計算ステップS212で求められたデバイスの電荷分布より、デバイス中の電圧（電位）分布を計算する。

【0038】続いて、ステップS214では、時間を進めて、ステップS215にて、粒子の挙動が定常状態になったか否かを判定し、定常状態となるまで、MC法及び繰り返し法を繰り返す。

【0039】続いて、粒子の挙動が定常状態となった場合には、ステップS216にて端子電圧設定ステップS203で設定したバイアスの全てについてシミュレーションを行ったか否かの判定を行う。この判定により全バイアスについてシミュレーションを行っていない場合には、端子電圧設定ステップS203により再びバイアス値を設定して、それ以降の計算を行う。また、全バイアスについてシミュレーションを行った場合には、結果出力ステップS217にてシミュレーション結果を出力して終了する。

【0040】本実施形態を用いて計算したエネルギー分布を図3に示す。従来技術に比べて、特に、高エネルギー分布についても安定なエネルギー分布が得られたのがわかる。

【0041】本実施形態は、外場または散乱によって、セル3内の分布のエネルギーが上昇し、3.1eVを越えた分布は粒子1に変換され、逆に散乱等でエネルギーを失い、3.1eV未満に低下した粒子1はセル3内の分布に変換されるようにすることで、粒子のシミュレーションによりMOSトランジスタのデバイスシミュレーションを行う例を説明した。本発明は、これに限られることなく、半導体装置の製造プロセスにおけるエッチン*

* グ工程、デポ工程、酸化工程等のプロセスシミュレーションにも適用することができ、また、他の分野、例えば、原子炉内の粒子のシミュレーション等にも適用することができる。

【0042】以上のように、本実施形態によれば、低確率の粒子の挙動が問題となる技術、例えば半導体デバイスの劣化やEEPROMのホット・エレクトロン書き込み特性、あるいはエッチングの特性を短時間で予測できるため、実際の製造前のシミュレーションによるプロセスやデバイスの設計を効率的に行うことができ、これにより、計算時間及び各種のコンピュータ資源の消費を低減しつつ、安定した結果を得ることができる。

【0043】

【発明の効果】以上説明してきたように、本発明に係る粒子シミュレーションによれば、計算時間及び各種のコンピュータ資源の消費を低減しつつ、安定した結果を得ることができる粒子シミュレーション方法を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【図1】本実施形態の粒子シミュレーション方法を説明するための概念図である。

【図2】本実施形態の粒子シミュレーション方法の処理を示すフローチャートである。

【図3】本実施形態によって計算したエネルギー分布を示す図表である。

【図4】ウインドウ領域設定ステップ205を説明するための図である。

【図5】ウインドウ領域を説明するための図である。

【図6】MC法を説明するための概念図である。

【図7】MC法によって計算したエネルギー分布を示す図表である。

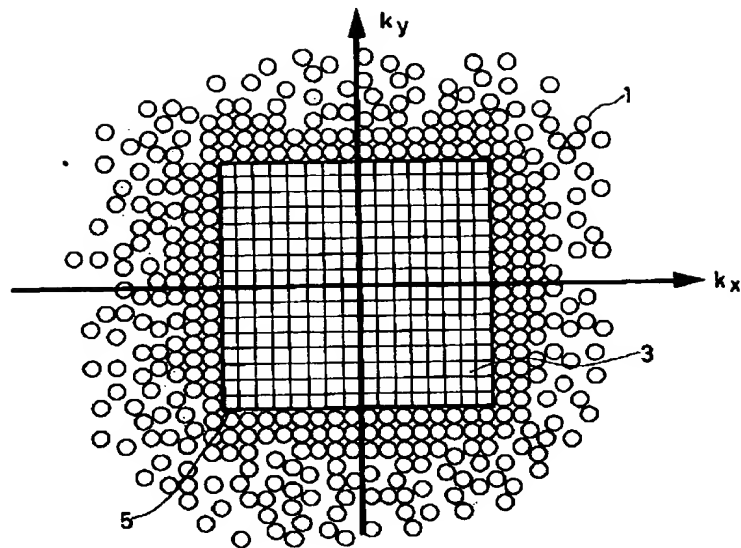
【図8】繰り返し法を説明するための概念図である。

【図9】繰り返し法のセルの例を示す図である。

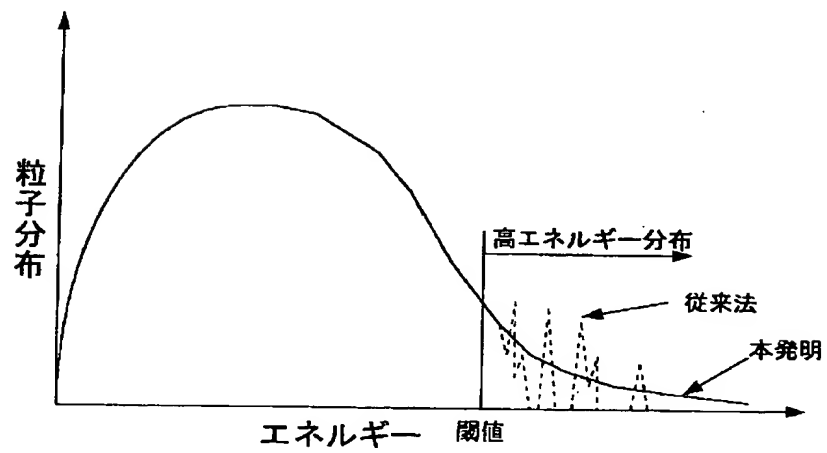
【符号の説明】

- 1 粒子
- 3 セル
- 5 閾値
- 7 ゲート電極
- 9 ゲート酸化膜
- 11 ソース拡散層
- 13 ドレイン拡散層
- 15 基板
- 17 ウインドウ領域

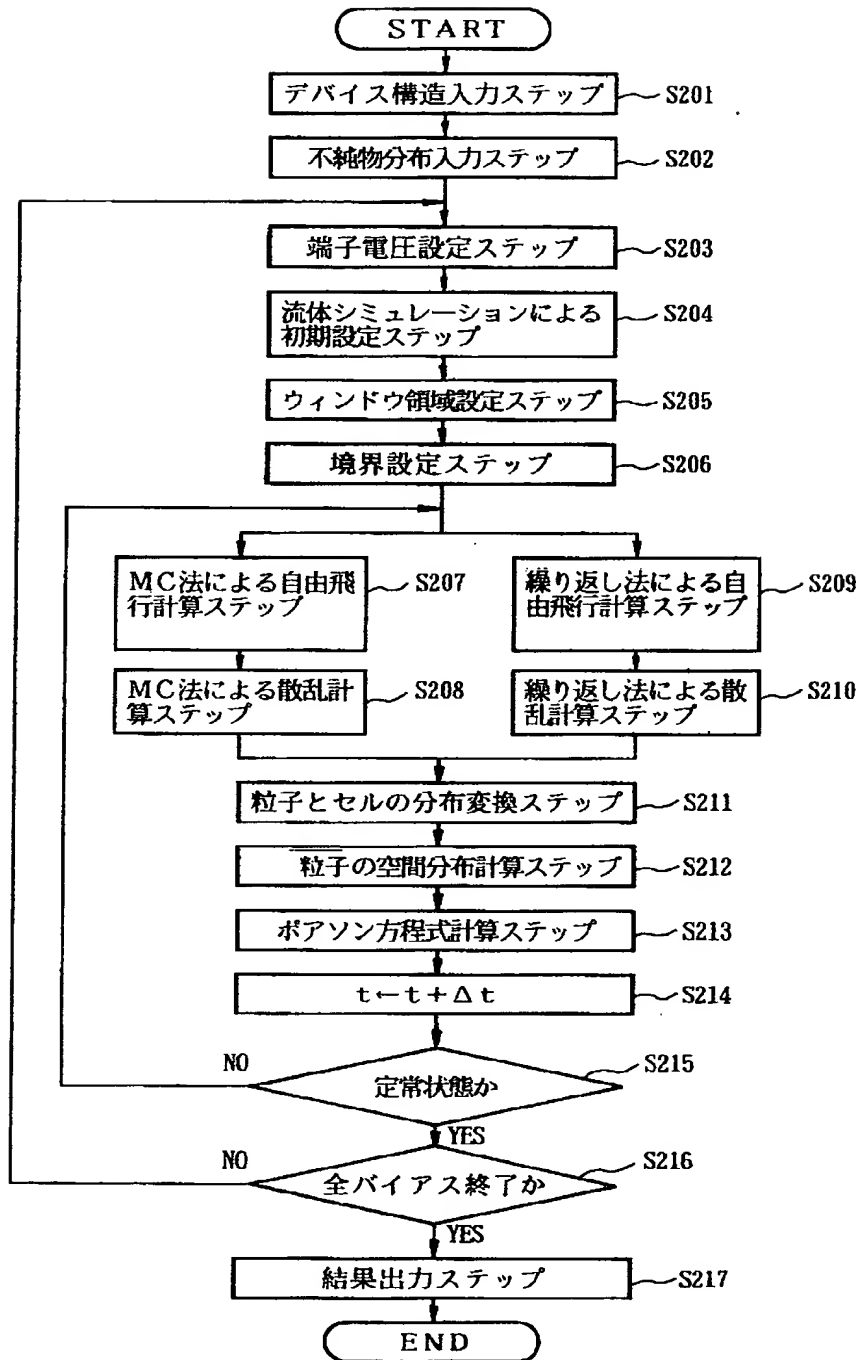
【図1】



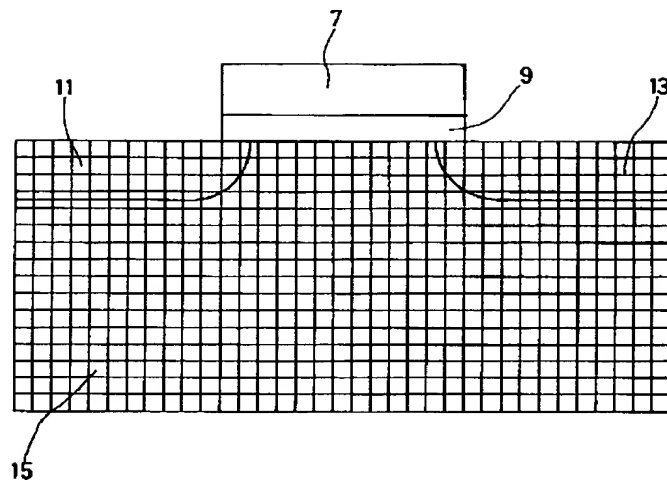
【図3】



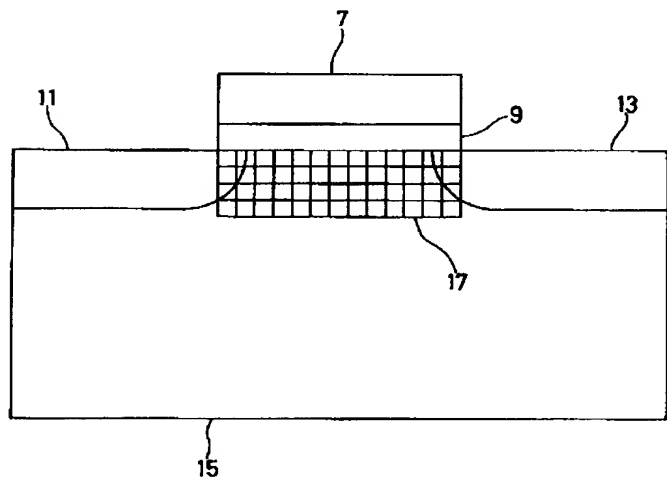
【図2】



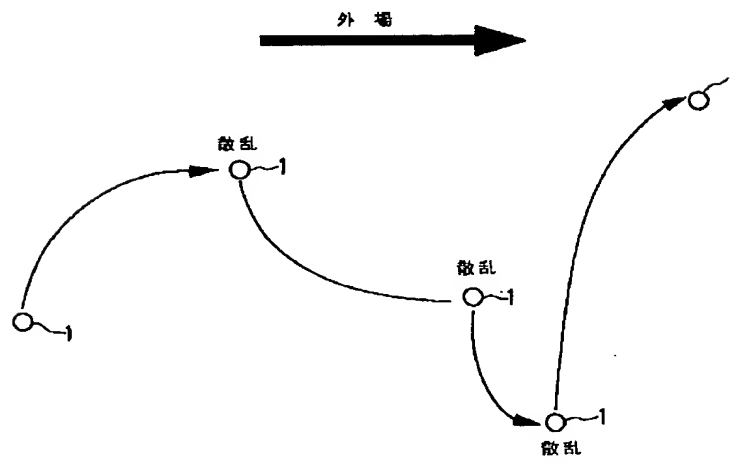
【図4】



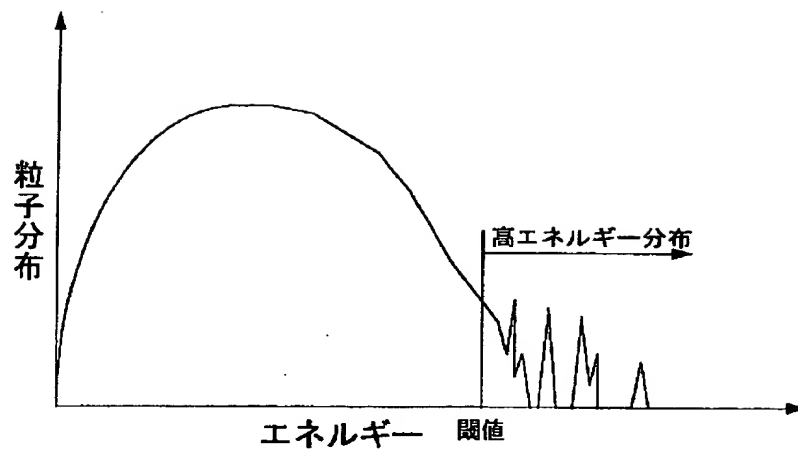
【図5】



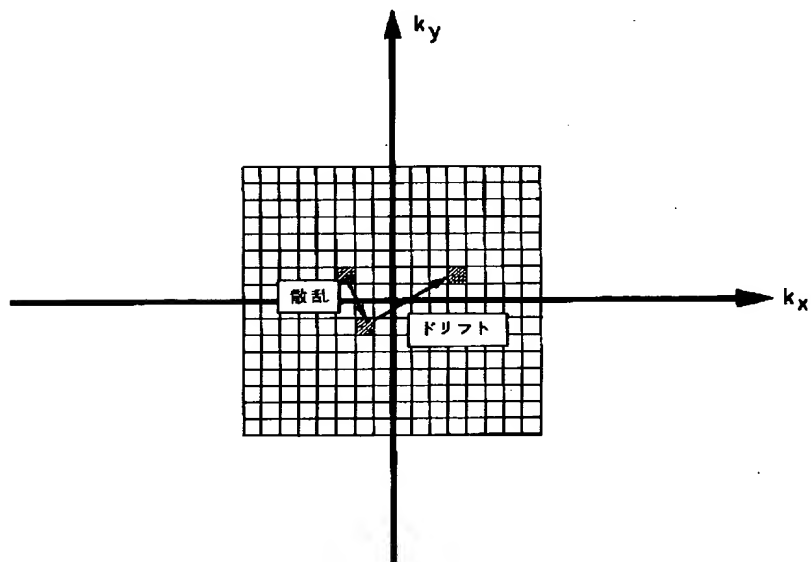
【図6】



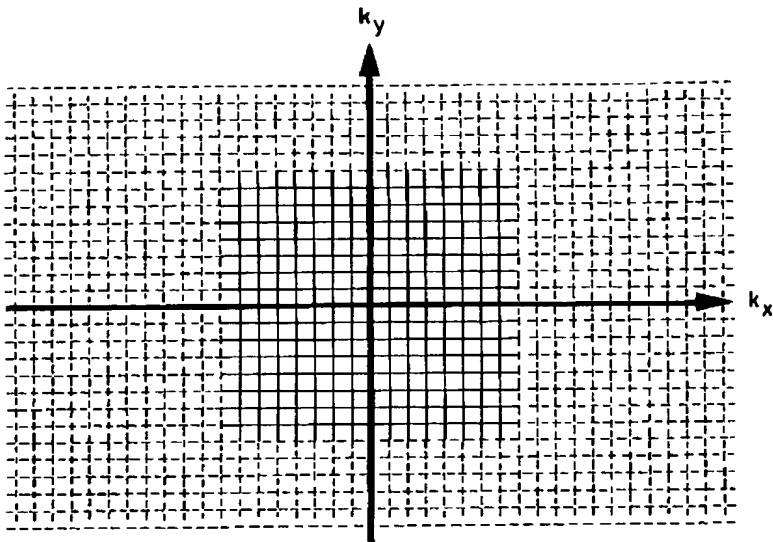
【図7】



【図8】



【図 9】



フロントページの続き

(51) Int. Cl. ⁶	識別記号	序内整理番号	F I	技術表示箇所
H O 1 L	29/788		H O 1 L 29/78	3 0 1 Z
	29/792			3 7 1
// H O 1 L	21/02		21/302	Z
	21/205			
	21/302			
	21/66			